

第17期CJC论坛暨优秀论文作者（2020年）学术报告会

报告时间：2023年3月25日
报告地点：君谋楼报告厅
欢迎听讲！



钟志翔 教授

福州中文大学 (FNU) / 清华大学

报告题目：热振动关联函数理论与MOMAP计算软件的开发

报告摘要：理论计算化学的核心是发展计算方法，尽管目前的计算化学软件已经能够基本解决许多化学问题，其主要问题是计算精度及分子到材料中的复杂、动态非平衡过程的模拟，仍然缺少可靠而实用的方法，尤其是与激发态相关的性能，是计算化学的挑战之一。以发光过程为例，计算软件可以给出大致可靠的发光波长，但是对于发光谱型和发光效率一直没有好的方法，这是因为这与电子激发态的振动耦合与弛豫过程相关，时间尺度从纳秒到毫秒，比微观理论能处理的飞秒-皮秒长的多，典型的电子态演化的步长是阿秒，从而会带来累积误差。我们在微扰论的框架下，提出了TVCF(Thermal Vibration Correlation Function)的理论形式，得到了非绝热跃迁速率的含时积分的解析表达式，可以高效地应用于计算发光效率、发光光谱、电荷迁移率等性能。我们将该方法编制成计算软件MOMAP (Molecular Materials Property Prediction Package)，先前是在网上公开发布，很受欢迎，很快就被下载了2600多次，包括哈佛大学、斯坦福大学以及包括日本、美国等在内的著名企业。在此基础上，我们将



石夙 教授

江苏师范大学/常州大学

报告题目：手性明噪化学

报告摘要：手性明噪化学在医药、农药、材料、手性催化材料等领域有着广泛的应用。随着手性明噪化学的发展，对光催化手性明噪化学的研究也日益深入。本报告主要介绍手性明噪化学在医药、农药、材料、手性催化材料等领域的应用。首先，介绍了手性明噪化学在医药领域的应用，包括手性明噪化学在药物合成中的应用。其次，介绍了手性明噪化学在农药领域的应用，包括手性明噪化学在农药合成中的应用。最后，介绍了手性明噪化学在材料领域的应用，包括手性明噪化学在材料合成中的应用。此外，还介绍了手性明噪化学在手性催化材料领域的应用，包括手性明噪化学在手性催化材料合成中的应用。



池永贵 教授

Prof. Yonggui Robin Chi
南洋理工大学/贵州大学

报告题目：NHC Catalysis, Medicines, and Agrochemicals

报告摘要：The CHI laboratory is committed to the study of research that addresses problems of both fundamental and practical significance in the area of chemical synthesis, medicines, and agrochemicals. For the first few years, one of the research focuses is on the development of new catalytic systems and systems development enabled by N-Heterocyclic Carbene (NHC) as the key ligand catalyst. It covers about the second few years, the third and fourth years would all be directed at

scale applications. The CHI laboratory is committed to the study of research that addresses problems of both fundamental and practical significance in the area of chemical synthesis, medicines, and agrochemicals. For the first few years, one of the research focuses is on the development of new catalytic systems and systems development enabled by N-Heterocyclic Carbene (NHC) as the key ligand catalyst. It covers about the second few years, the third and fourth years would all be directed at



孙道军 教授

中国石油大学 (华东)

报告题目：晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究

报告摘要：晶态多孔材料在气体分离、催化、吸附等领域有着广泛的应用。本报告主要介绍晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究。首先，介绍了晶态多孔材料的结构调控方法，包括晶态多孔材料的合成、表征和性能评价。其次，介绍了晶态多孔材料的气体分离性能研究，包括晶态多孔材料在气体分离中的应用。最后，介绍了晶态多孔材料在催化、吸附等领域的应用。

时间	议程	主持人
8:20-9:30	开幕致辞	游书万
9:30-10:30	钟志翔 (福州中文大学 (深圳) / 清华大学) 热振动关联函数理论与MOMAP计算软件的开发	刘国生
10:30-11:30	石夙 (江苏师范大学/常州大学) 手性明噪化学	王新平
14:00-15:00	池永贵 (新加坡南洋理工大学/贵州大学) NHC Catalysis, Medicines, and Agrochemicals	麻生明
15:00-16:00	孙道军 (中国石油大学 (华东)) 晶态多孔材料的结构调控及其气体分离性能研究	
16:00-16:10	闭幕	



WILEY-VCH



17 CJC

(2020)

2023 3 25

2023 3 25